

Синтез ацилтерфенилов из ацетиларенов и арилацетиленов в суперосновной среде: квантовохимическое моделирование

Манжуева А. А.

Аннотация

Классические методы получения замещенных терфенилов включают жесткие условия или катализаторы на основе дорогих переходных металлов. Недавно сотрудниками Иркутского института химии были синтезированы ацилтерфенилы из ацетиларенов и арилацетиленов в суперосновной среде KO^tBu/DMSO. Эта уникальная реакция позволяет селективно получать терфенилы с различными заместителями из простых доступных реагентов и без использования дорогих катализаторов.

Согласно предложенному авторами эксперимента механизму сборки терфенилов включает несколько последовательных стадий: C-винилирование, альдольно-кетоновую конденсацию, 1,3-прототропную перегруппировку, электроциклизацию и элиминирование бензильного аниона. Примечательно, что реакция альдольно-кетоновой конденсации, нежелательная при взаимодействии кетонов с ацетиленами в суперосновных средах, в данном случае предполагается как одна из ключевых стадий на пути образования терфенилов из ацетиларенов и арилацетиленов в суперосновной среде. Для более глубокого понимания и подтверждения предложенного механизма полезным и оправданным является привлечение методов квантовой химии, которые сегодня используются как один из базовых инструментов исследования механизмов реакций.

Целью данной работы является квантовохимическое исследование сборки терфенилов на примере взаимодействия ацетофенона с фенилацетиленом с подробным описанием механизма этой реакции, который включает анализ конформационного строения интермедиатов и продукта и оценку термодинамических и кинетических характеристик каждой стадии.